数理解析研究所講究録
434巻 1981年 108-117

Generalized Random Walksの粗視化

東北大 工　原 啓明

§1 序

通常,時間変化する現象は微分方程式の形で記述されるものが多い。我々がこの現象を離散型の差分方程式で記述する場合,時空に関する,ある種の粗視化を行う必要がある。又,現象によっては,興味ある関係を引き出すため差分方程式を改めてもう一度粗視化を行う事がある[1]。

ここでは,この粗視化の問題を考える。離散型の差分方程式として,ランダム・ウォーク(RW),或いは一般化したランダム・ウォーク(GRW)を考え,具体的にこれ等の粗視化の方法を示す。このGRWは,非線型非平衡状態の問題に適用するため拡張したもので,非マルコフ過程である[2]。特に,粗視化を行ったGRWでは,連続体極限をとつて得られた時間発展の式はHopf方程式[3]の型に表現出来ることを示す。

§2 粗視化されたランダム・ウォーク

時間変化する現象では，その情報の不足或いは詳細な情報を無視することによって，必然的に我々は粗視化された現象の記述から出発することになる。この意味において，ランダム・ウォーク(RW)の漸化式は，連続体極限によって得られたFokker-Planck (FP)方程式から逆に時空に対する基本単位，Δt_0, a_0による粗視化を行って得られた差分方程式と見なすことが出来る。この点を示すため，次のRWの漸化式を考える。

$$W(m,N) = \sum_{\substack{\alpha \\ (\alpha=+,-,0)}} P^{\alpha}(m|m-\alpha)\,W(m-\alpha, N-1), \qquad (2.1)$$

$W(m,N)$ はウォーカーが，Nステップ後に位置 m に来る確率，P^{α} は $m-\alpha$ から m へジャンプする確率である。この確率は $\sum_\alpha P^{\alpha}(m+\alpha|m) = 1$ と規格化されている。(2.1)は連続体極限では次のFP方程式となる。

$$\frac{\partial w(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}K_1(x)w + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}K_2(x)w\ , \qquad (2.2)$$

$$K_n(x) = \frac{a_0^n}{\Delta t_0}\left(p^{+}(x) + (-1)^n p^{-}(x)\right), \qquad (2.3)$$

上式の小文字で表わされた関数 w, p^{α} は(2.1)の離散型の関数に対応するもので，たとえば $w(x\mp a_0, t-\Delta t_0)$ は

$$W(m\mp 1, N-1) = W\left(\frac{1}{a_0}(x\mp a_0), \frac{1}{\Delta t_0}(t-\Delta t_0)\right), \qquad (2.4)$$

に対応している。又連続変数 x, t は $x = ma_0,\ t = N\Delta t_0$ で導入されている。従って (2.2), (2.3) で記述される現象の時間発展は，基本単位 $a_0, \Delta t_0$ で粗視化された離散型の (2.1) によってモデル化される。同様な議論を"結合したランダム・ウォーク"と連立レート方程式との間でも行うことが可能である。[4]

§3 漸化式の粗視化

問題によっては興味ある関係式を引き出すため，(2.1) の離散型の漸化式自身を更に粗視化する必要が生じる。[1] この粗視化を (2.1) より一般的な次の漸化式で考える。

$$W(m, N) = \sum_{\alpha} P^{\alpha}_{N-1}(m|m-\alpha)\, W(m-\alpha, N-1) \tag{3.1}$$

(2.1) との違いは P^{α} が N 依存性を持っているところである。時空スケールを $\Delta t, a$ とした粗視化を

$$\langle W(m,N)\rangle = \frac{a_0}{a}\frac{\Delta t_0}{\Delta t} \sum_{m_1 = m - \frac{a}{2a_0}} \sum_{N_1 = N - \frac{\Delta t}{2\Delta t_0}} W(m_1, N_1), \tag{3.2}$$

で定義すると，(3.1) は形式的に

$$\langle W(m, N)\rangle = \sum_{\alpha} \langle\langle P^{\alpha}_{N-1}(m|m-\alpha)\rangle\rangle \langle W(m-\alpha, N-1)\rangle, \tag{3.3}$$

$$\langle\langle P^{\alpha}_{N-1}(m|m-\alpha)\rangle\rangle = \frac{\langle P^{\alpha}_{N-1}(m|m-\alpha)\, W(m-\alpha, N-1)\rangle}{\langle W(m-\alpha, N-1)\rangle}, \tag{3.4}$$

と書ける。粗視化の後で変数 m, N から $a, \Delta t$ を単位とした新しい変数 m', N' に書きかえて $\tilde{P}^{\alpha}_{N'-1}$ を次式で定義する。

$$W'(m', N') = \sum_{\alpha} \tilde{P}^{\alpha}_{N'-1}(m'|m'-\alpha) W'(m'-\alpha, N'-1) . \quad (3.5)$$

とくに,(I) $\tilde{P}^{\alpha}_{N'-1}(m'|m'-\alpha) = \tilde{P}^{\alpha}(\alpha)$ のとき, $\tilde{P}^{\alpha}(\alpha) = P^{\alpha}(\alpha)$ となる。このことは, $a/2a_0 = \Delta t/2\Delta t_0 = s$ とおき,(3.1)の漸化式で s ステップ前までさかのぼり, $P^{\alpha}(m|m-\alpha) = P^{\alpha}(\alpha)$ とし,又 $a, \Delta t$ の領域では W がほとんど変化しないと考えて直接示すことが出来る。

$$\tilde{P}^{\alpha}_{N'-1}(m'|m'-\alpha) = P^{\alpha}_{N-1}(\alpha)\Big(\sum_{\beta_1} P^{\beta_1}\Big)\Big(\sum_{\beta_2} P^{\beta_2}\Big)\cdots\Big(\sum_{\beta_{s-1}} P^{\beta_{s-1}}\Big)$$
$$= P^{\alpha}(\alpha) \quad (3.6)$$

即ち $\tilde{P}^{\alpha}_{N'-1}$ と P^{α}_{N-1} との間に類似な関係が成立する。(3.4)から分かる様に,(II) $P^{\alpha}_{N-1}(m|m-\alpha)$ が W にくらべてゆっくり変化する場合は $\tilde{P}^{\alpha}_{N'-1}(m'|m'-\alpha) = P^{\alpha}_{N-1}(m|m-\alpha)$ となる。又(3.6)からの類推から(I)(II)よりもっと $P^{\alpha}_{N-1}(m|m-\alpha)$ の変化をとり入れたものとして,(III)各ステップで逐次的に同じ P^{α} の空間依存性をとり入れた

$$\tilde{P}^{+}_{N'-1}(m'|m'-1) \Big(\equiv \tilde{\rho}^{+}_{N-1}(m|m-1) \Big/ \sum_{i=0}^{s-1} \lambda^i$$
$$\equiv P^{+}_{N-1}(m|m-1)\Big[1 + \lambda \tilde{\rho}^{+}_{N-2}(m|m-1)\Big] \Big/ \sum_{i=0}^{s-1} \lambda^i \Big)$$
$$= P^{+}_{N-1}(m|m-1)\Big[1 + \lambda P^{+}_{N-2}(m|m-1) + \lambda^2 P^{+}_{N-2}(m|m-1)$$

$$\cdot P^{+}_{N-3}(m|m-1) + \cdots + \lambda^{S-1} P^{+}_{N-2}(m|m-1) \cdots P^{+}_{N-S}(m|m-1) \Big] \Big/ \sum_{i=0}^{S-1} \lambda^{i}$$

$$(\lambda < 1) \tag{3.7}$$

を考える。(I)〜(III),いずれの場合も,$\Sigma_\alpha \tilde{P}^{\alpha}_{N'-1}(m'+\alpha|m') = 1$を満している。これ等のモデル過程に応じて,(3.3)から出発し,連続体極限を行うと,(2.2)のFP方程式のwはw'となり,係数K_nは

$$\tilde{K}_n(x', t') = \frac{a^n}{\Delta t}\left(\tilde{P}^{+}(x', t') + (-1)^n \tilde{P}^{-}(x', t')\right) \tag{3.8}$$

となる。これは粗視化による一種の係数のくり込みである。

§4 非マルコフ過程

これまで,漸化式は(2.1)及び(3.1)を満すマルコフ過程を考えて来た。ここでは次式で表わされた非マルコフ過程を考える。

$$W(m, N ; \varepsilon) = \sum_{\alpha} P^{\alpha}_{N-1}(m|m-\alpha ; \varepsilon)\, W(m-\alpha, N-1 ; \varepsilon), \tag{4.1}$$

又P^{α}_{N-1}は

$$\begin{aligned} P^{\alpha}_{N-1}(m|m-\alpha ; \varepsilon) = P^{\alpha}(m|m-\alpha ; 0) &+ \alpha\varepsilon\, W(m-\alpha, N-2 ; 0) + \cdots \\ &+ \alpha\varepsilon^{n} W(m-\alpha, N-2 ; 0)\, W(m-\alpha, N-3 ; 0) \cdots \\ &W(m-\alpha, N-n-1 ; 0), \end{aligned} \tag{4.2}$$

$\varepsilon = 0$ に対する漸化式は,§3の場合と同じものとする。(4.2)の P^{α}_{N-1} の規格化は $\sum_{\alpha} P^{\alpha}(m+\alpha|m) = 1$ から導ける。(2.4)と同様に a_0, Δt_0 で連続変数を導入し,連続関数を対応させると,(4.1),(4.2)に相当する関係式は

$$w(x,t;\varepsilon) = \sum_{\alpha} P^{\alpha}_{t-\Delta t_0}(x|x-\alpha a_0;\varepsilon)\, w(x-\alpha a_0, t-\Delta t_0:\varepsilon) \tag{4.3}$$

$$\begin{aligned} P^{\alpha}_{t-\Delta t_0}(x|x-\alpha a_0;\varepsilon) = {} & P^{\alpha}(x|x-\alpha a_0;0) + \alpha\varepsilon\,[P^{\beta}w_{\beta}]_{t-2\Delta t_0} + \alpha\varepsilon^2 \\ & \cdot [P^{\beta_1}w_{\beta_1}]_{t-2\Delta t_0}[P^{\beta_2}w_{\beta_2}]_{t-3\Delta t_0} + \cdots \\ & + \alpha\varepsilon^{n}[P^{\beta_1}w_{\beta_1}]_{t-2\Delta t_0}\cdot[\quad]\cdots[P^{\beta_n}w_{\beta_n}]_{t-(n+1)\Delta t_0} \end{aligned} \tag{4.4}$$

$$\left([P^{\beta}w_{\beta}]_t \equiv \sum_{\beta} P^{\beta}(x-\alpha a_0|x-(\alpha-\beta)a_0;0)\, w(x-(\alpha-\beta)a_0, t;0) \right)$$

となる。$a_0, \Delta t_0 \to 0$, $a_0^2/\Delta t_0 =$ 一定の連続体極限をとれば,w に関する時間発展の式,

$$\begin{aligned} \frac{\partial w(x,t:\varepsilon)}{\partial t} &= \frac{1}{\Delta t_0}\Big[\sum_{\alpha} P^{\alpha}_t(x|x-\alpha a_0;\varepsilon)\, w(x-\alpha a_0, t:\varepsilon) - \sum_{\alpha} P^{\alpha}_t(x+\alpha a_0|x;\varepsilon) \\ &\qquad \cdot w(x,t:\varepsilon) \Big] \\ &= \frac{1}{\Delta t_0}\Big[\sum_{\alpha} \{ P^{\alpha} + \alpha\varepsilon[P^{\beta}w_{\beta}]_t + \alpha\varepsilon^2[P^{\beta_1}w_{\beta_1}]_t[P^{\beta_2}w_{\beta_2}]_t \\ &\qquad + \cdots + \alpha\varepsilon^{n}[P^{\beta_1}w_{\beta_1}]_t[\quad]_t\cdots[P^{\beta_n}w_{\beta_n}]_t \} \end{aligned}$$

$$\cdot W(x-\alpha a_0, t:\varepsilon) - W(x, t:\varepsilon) \Big] \equiv F\left[x, t \,|\, W.\{P^\alpha\}\right], \quad (4.5)$$

を得る。この式に対する粗視化の定義式は

$$\langle W(x,t;\varepsilon)\rangle = \frac{1}{a}\frac{1}{\Delta t}\int_{x-\frac{a}{2}}^{x+\frac{a}{2}}\int_{t-\frac{\Delta t}{2}}^{t+\frac{\Delta t}{2}} W(x_1, t_1;\varepsilon)\,dx_1\,dt_1 \quad (4.6)$$

である。((3.2)参照))

この粗視化により，(3.5)に相当する連続関数 $W'(x',t';\varepsilon)$ $(=\langle W(x',t';\varepsilon)\rangle_{t'})$ の時間発展の式は

$$\frac{\partial W'(x',t';\varepsilon)}{\partial t'} = F\left[x', t' \,|\, W'.\{\tilde{P}^\alpha\}\right] \quad (4.7)$$

となる。その時空スケールは Δt, a である。§3 から分る様に P^α がゆっくり変化するときは $\tilde{P}^\alpha = P^\alpha$ となる。

§5 Hopf 方程式

前節で導出した時間発展方程式(4.7)は考えている過程が非マルコフ過程であることから非線型方程式である。ここでは特性汎関数 $\Xi[x',t' \,|\, \{\tilde{P}^\alpha\}]$ を導入することで，(4.7) を解く代りに，線型である Ξ の時間発展方程式の形式解から，$W'(x',t';\varepsilon)$ が求まることを示す。

特性汎関数として

$$\Xi[x',t'|\{\tilde{p}^\alpha\}] = 1 + i\sum_\beta \tilde{p}^\beta \langle w'_\beta \rangle_{t'} + \frac{i^2}{2!}\sum_{\beta_1}\sum_{\beta_2} \tilde{p}^{\beta_1}\tilde{p}^{\beta_2}\langle w'_{\beta_1} w'_{\beta_2}\rangle_{t'}$$

$$+\cdots + \frac{i^n}{n!}\sum_{\beta_1}\cdots\sum_{\beta_n}\tilde{p}^{\beta_1}\cdots\tilde{p}^{\beta_n}\langle w'_{\beta_1}\cdots w'_{\beta_n}\rangle_{t'} + \cdots$$

$$= \langle e^{i\tilde{p}\cdot w'}\rangle_{t'} \qquad (5.1)$$

$$\left(\langle w'_\beta \rangle_{t'} = w'(x',t';\varepsilon), \quad \tilde{p}\cdot w' = [\tilde{p}^\beta w'_\beta] \right)$$

ここで $\langle w'_\beta \rangle_{t'}$ は(4.7)で使った関数即ち粗視化を行った後でスケールを変えたもので，(4.6)とは違う。Ξの時間変化を

$$\frac{\partial \Xi}{\partial t'} = \lim_{\Delta t\to 0} \frac{\Xi[x',t+\Delta t|\{\tilde{p}^\alpha\}] - \Xi[x',t'|\{\tilde{p}^\alpha\}]}{\Delta t}, \qquad (5.2)$$

で定義すると

$$\frac{\partial \Xi}{\partial t'} = i\sum_\alpha p^\alpha \langle \bar{F}[x'-\alpha a, t'|w', \{\tilde{p}^\alpha\}]\, e^{i\tilde{p}\cdot w'}\rangle. \qquad (5.3)$$

この式は更に変形出来て，次の線型時間発展方程式となる。

$$\frac{\partial \Xi}{\partial t'} = i\mathcal{L}\ \Xi[x',t'|\{\tilde{p}^\alpha\}], \qquad (5.4)$$

$$\mathcal{L} \equiv \sum_\alpha p^\alpha \bar{F}\left[x'-\alpha a, t' \,\middle|\, \frac{\delta}{i\delta\tilde{p}^\alpha}, \{\tilde{p}^\alpha\}\right], \qquad (5.5)$$

この式はHopf方程式[3),5)]と同型である。(5.1)から分る様に，任意の時刻における粗視化された確率分布，$w'(x',t')$ $(=\langle w(x,t)\rangle_{t'})$，$w$の相関 $\langle w(x_1,t')w(x_2,t')\rangle_{t'}$，は

$$\langle w(x'-\beta_1 a, t')\rangle_{t'} = -i\left(\frac{\delta \Xi}{\delta \tilde{p}^{\beta_1}}\right)_{\{\tilde{p}^{\beta_1}\}=\cdots=\{\tilde{p}^{\beta_n}\}=0} \tag{5.6}$$

$$\langle w(x'-\beta_1 a, t')\, w(x'-\beta_2 a, t')\rangle_{t'} = -\left(\frac{\delta^2 \Xi}{\delta \tilde{p}^{\beta_1}\delta \tilde{p}^{\beta_2}}\right)_{\{\tilde{p}^{\beta_1}\}=\cdots=\{\tilde{p}^{\beta_n}\}=0} \tag{5.7}$$

で求められる。

(5.4) の形式解は線型であることから, (5.4) を満足する Green 関数, $G[\tilde{p}'', \tilde{p}' \mid t'', t']$, を使って次の様に書ける。

$$\Xi[x', t'' \mid \{\tilde{p}^{\alpha''}\}] = \int G[\tilde{p}'', \tilde{p}' \mid t'', t']\, \Xi[x', t' \mid \{\tilde{p}^{\alpha'}\}] \cdot dV[\{\tilde{p}'^{\alpha}\}] \tag{5.8}$$

$$\left(\tilde{p}'' \equiv \{\tilde{p}^{\alpha''}\},\quad dV[\{\tilde{p}'^{\alpha}\}] \equiv \prod_{x'}\prod_{\alpha} d\tilde{p}'^{\alpha}(x'|x'-\alpha) \right)$$

この G は経路積分で表現出来る。[5),6)]

§6 まとめ

ランダム・ウォーク, 或いは一般化されたランダム・ウォークの漸化式を使って, 時間発展する現象の粗視化を具体的に考えた。これ等の漸化式から連続体極限によって得られた Fokker-Planck 方程式の係数 K_1, K_2 は, 漸化式の粗視化によって, 一種のくり込みが行われることを示した。 又非マルコフ過程

を表わす漸化式,(4·1),(4.2)では,粗視化を行った確率分布,Wの相関,$\langle W'_{\beta}\rangle_{t'}$,$\langle W'_{\beta_1} W'_{\beta_2}\rangle_{t'}$,$\cdots$ 等によって特徴づけられた特性汎関数を導入することで,非線型である$\langle W'_{\beta}\rangle_{t'}$の時間発展方程式を形式的には線型であるHopf方程式の形に変換した。

参考文献

1) たとえば濃厚高分子溶液では二種類のランダムネスを含み,一方を粗視化することで消去する。「非線型非平衡の統計力学」(研究会 1980.11).
H. Hara : to be appear in Z. Physik B (1981)

2) 原 啓明:数理科学講究録 405 (1980), 215

3) E. Hopf : J. Rat1. Mech. Anal. 1 (1952), 87

4) H. Hara, S. Fujita : Z. Physik B32 (1978), 99

5) G. Rosen : Phys. Fluid. 3 (1960), 106, 112

6) 細川 巌:数理科学講究録 367 (1979), 232